```
data_lach24

_publ_section_comment
;
Very poor quality data meant the structure could not be solved,
however most of the atoms in the polyoxotungstate
clusters were located.
;

_audit_creation_method            SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common             ?
_chemical_melting_point           ?
_chemical_formula_moiety          ?
_chemical_formula_sum
 'C54 H123 N3 O37 P4 W10'
_chemical_formula_weight          3368.93

loop_
 _atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scat_dispersion_real
 _atom_type_scat_dispersion_imag
 _atom_type_scat_source
 'C'  'C'   0.0033   0.0016
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'H'  'H'   0.0000   0.0000
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'N'  'N'   0.0061   0.0033
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'O'  'O'   0.0106   0.0060
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'P'  'P'   0.1023   0.0942
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'W'  'W'  -0.8490   6.8722
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting            Monoclinic
_symmetry_space_group_name_H-M    'P a'

loop_
 _symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'
 'x+1/2, -y, z'

_cell_length_a                    19.131(9)
_cell_length_b                    20.933(10)
_cell_length_c                    23.461(11)
_cell_angle_alpha                 90.00
_cell_angle_beta                  100.853(4)
_cell_angle_gamma                 90.00
_cell_volume                      9227(8)
_cell_formula_units_Z             2
_cell_measurement_temperature     150(2)
_cell_measurement_reflns_used     ?
_cell_measurement_theta_min       3.6
_cell_measurement_theta_max       24.0

_exptl_crystal_description        ?
_exptl_crystal_colour             Colourless
_exptl_crystal_size_max           0.04
_exptl_crystal_size_mid           0.04
```

```
_exptl_crystal_size_min           0.02
_exptl_crystal_density_meas       ?
_exptl_crystal_density_diffrn     1.213
_exptl_crystal_density_method     'not measured'
_exptl_crystal_F_000              3128
_exptl_absorpt_coefficient_mu     6.277
_exptl_absorpt_correction_type    empirical
_exptl_absorpt_correction_T_min   ?
_exptl_absorpt_correction_T_max   ?
_exptl_absorpt_process_details    'Sadabs'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature       150(2)
_diffrn_radiation_wavelength      0.79720
_diffrn_radiation_type            'Synchrotron'
_diffrn_radiation_source          'Daresbury SRS'
_diffrn_radiation_monochromator   graphite
_diffrn_measurement_device_type   'Station 16.2'
_diffrn_measurement_method        'CCD slices'
_diffrn_detector_area_resol_mean  ?
_diffrn_standards_number          ?
_diffrn_standards_interval_count  ?
_diffrn_standards_interval_time   ?
_diffrn_standards_decay_%         ?
_diffrn_reflns_number             42452
_diffrn_reflns_av_R_equivalents   0.2051
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI     0.3302
_diffrn_reflns_limit_h_min        -19
_diffrn_reflns_limit_h_max        19
_diffrn_reflns_limit_k_min        -21
_diffrn_reflns_limit_k_max        21
_diffrn_reflns_limit_l_min        -23
_diffrn_reflns_limit_l_max        23
_diffrn_reflns_theta_min          3.60
_diffrn_reflns_theta_max          23.95
_reflns_number_total              19764
_reflns_number_gt                 5149
_reflns_threshold_expression      >2sigma(I)

_computing_data_collection        ?
_computing_cell_refinement        ?
_computing_data_reduction         ?
_computing_structure_solution     'SHELXS-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_structure_refinement   'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_molecular_graphics     'Ortep-3 for Windows'
_computing_publication_material   'WinGX'

_refine_special_details
;
 Refinement of F^2^ against ALL reflections.  The weighted R-factor
wR and
 goodness of fit S are based on F^2^, conventional R-factors R are
based
 on F, with F set to zero for negative F^2^. The threshold expression
of
 F^2^ > 2sigma(F^2^) is used only for calculating R-factors(gt) etc.
and is
 not relevant to the choice of reflections for refinement.  R-factors
based
 on F^2^ are statistically about twice as large as those based on F,
and R-
 factors based on ALL data will be even larger.
```

```
;

_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            fullcycle
_refine_ls_weighting_scheme       calc
_refine_ls_weighting_details
 'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.1979P)^2^+0.0000P] where P=(Fo^2^+2Fc^2
^)/3'
_atom_sites_solution_primary      direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    geom
_refine_ls_hydrogen_treatment     constr
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_abs_structure_details
 'Flack H D (1983), Acta Cryst. A39, 876-881'
_refine_ls_abs_structure_Flack    0.00
_refine_ls_number_reflns          19764
_refine_ls_number_parameters      483
_refine_ls_number_restraints      261
_refine_ls_R_factor_all           0.3634
_refine_ls_R_factor_gt            0.1384
_refine_ls_wR_factor_ref          0.4700
_refine_ls_wR_factor_gt           0.3484
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    1.010
_refine_ls_restrained_S_all       1.028
_refine_ls_shift/su_max           0.474
_refine_ls_shift/su_mean          0.073

loop_
 _atom_site_label
 _atom_site_type_symbol
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_adp_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_symmetry_multiplicity
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_assembly
 _atom_site_disorder_group
O3 O 0.703(4) 0.254(3) 0.141(3) 0.18(3) Uiso 1 1 d U . .
O4 O 0.684(3) 0.106(2) 0.100(2) 0.143(19) Uiso 1 1 d DU . .
O7 O 0.522(4) -0.012(2) 0.224(3) 0.23(3) Uiso 1 1 d DU . .
O9 O 0.468(3) 0.057(3) 0.255(3) 0.170(17) Uiso 1 1 d U . .
O12 O 0.439(4) 0.342(4) 0.397(3) 0.27(3) Uiso 1 1 d DU . .
O14 O 0.506(3) 0.362(3) 0.324(2) 0.150(16) Uiso 1 1 d U . .
O16 O 0.576(4) 0.427(4) 0.208(2) 0.214(19) Uiso 1 1 d DU . .
O17 O 0.658(3) 0.390(2) 0.230(2) 0.105(16) Uiso 1 1 d U . .
O17A O 0.404(3) 0.116(3) 0.352(2) 0.146(19) Uiso 1 1 d U . .
O21 O 0.596(3) 0.307(3) 0.115(2) 0.15(2) Uiso 1 1 d U . .
O22 O 0.594(5) 0.185(4) 0.110(4) 0.21(2) Uiso 1 1 d U . .
O23 O 0.474(3) 0.107(3) 0.169(2) 0.109(19) Uiso 1 1 d U . .
O24 O 0.398(6) 0.179(5) 0.242(5) 0.23(4) Uiso 1 1 d U . .
O25 O 0.418(2) 0.292(2) 0.2728(16) 0.060(13) Uiso 1 1 d U . .
O26 O 0.533(2) 0.362(2) 0.2040(16) 0.092(17) Uiso 1 1 d DU . .
O27 O 0.469(5) 0.371(4) 0.083(4) 0.21(3) Uiso 1 1 d U . .
O28 O 0.4652(19) 0.2672(18) 0.0739(15) 0.053(11) Uiso 1 1 d U . .
O29 O 0.456(6) 0.176(5) 0.034(2) 0.29(3) Uiso 1 1 d DU . .
O30 O 0.381(4) 0.185(4) 0.141(3) 0.16(3) Uiso 1 1 d U . .
O32 O 0.388(4) 0.305(4) 0.158(3) 0.143(18) Uiso 1 1 d U . .
O33 O 0.507(2) 0.219(2) 0.1960(19) 0.067(14) Uiso 1 1 d U . .
O35 O 0.640(4) 0.033(3) 0.403(3) 0.14(3) Uiso 0.88(7) 1 d PU . .
O37 O 0.561(3) 0.376(3) 0.771(2) 0.110(17) Uiso 1 1 d U . .
```

```
O39 O 0.620(3) 0.346(3) 0.677(3) 0.132(15) Uiso 1 1 d U . .
O40 O 0.631(4) 0.400(3) 0.582(3) 0.16(2) Uiso 1 1 d U . .
O41 O 0.672(4) 0.477(2) 0.627(3) 0.18(2) Uiso 1 1 d DU . .
O42 O 0.771(2) 0.412(2) 0.604(2) 0.095(15) Uiso 1 1 d U . .
O43 O 0.717(3) 0.289(3) 0.510(2) 0.108(17) Uiso 1 1 d U . .
O44 O 0.874(3) 0.339(3) 0.525(3) 0.14(2) Uiso 1 1 d U . .
O45 O 0.807(3) 0.223(3) 0.559(2) 0.13(2) Uiso 1 1 d U . .
O47 O 0.904(7) 0.095(6) 0.570(5) 0.34(6) Uiso 1 1 d U . .
O48 O 0.7990(17) 0.0952(17) 0.6064(13) 0.021(9) Uiso 1 1 d U . .
O49 O 0.719(2) 0.008(2) 0.7144(19) 0.094(16) Uiso 1 1 d DU . .
O51 O 0.572(3) 0.119(3) 0.796(3) 0.19(2) Uiso 1 1 d DU . .
O52 O 0.597(3) 0.248(3) 0.793(3) 0.14(2) Uiso 1 1 d U . .
O56 O 0.793(4) 0.255(3) 0.722(3) 0.15(3) Uiso 1 1 d U . .
O57 O 0.693(2) 0.341(3) 0.784(3) 0.15(2) Uiso 1 1 d DU . .
O58 O 0.771(2) 0.3934(19) 0.7131(16) 0.054(12) Uiso 1 1 d U . .
O59 O 0.873(3) 0.330(3) 0.641(2) 0.13(2) Uiso 1 1 d U . .
O60 O 0.875(4) 0.171(4) 0.658(3) 0.16(3) Uiso 1 1 d U . .
O61 O 0.774(4) 0.105(3) 0.748(3) 0.156(18) Uiso 1 1 d U . .
O62 O 0.715(4) 0.169(3) 0.801(2) 0.116(19) Uiso 1 1 d U . .
O63 O 0.805(2) 0.407(2) 0.8288(18) 0.092(16) Uiso 1 1 d DU . .
O64 O 0.885(3) 0.324(3) 0.761(2) 0.106(19) Uiso 1 1 d U . .
O65 O 1.004(4) 0.246(3) 0.704(3) 0.16(3) Uiso 1 1 d U . .
O66 O 0.899(5) 0.202(4) 0.780(3) 0.17(3) Uiso 1 1 d U . .
O67 O 0.852(3) 0.139(2) 0.8663(19) 0.116(17) Uiso 1 1 d DU . .
O68 O 0.772(5) 0.185(4) 0.801(4) 0.140(17) Uiso 1 1 d U . .
O18 O 0.630(3) 0.220(2) 0.216(2) 0.095(18) Uiso 1 1 d U . .
P5 P 0.7130(8) 0.2345(9) 0.6653(7) 0.020(4) Uiso 1 1 d U . .
W1 W 0.6811(5) 0.3185(4) 0.1678(4) 0.214(3) Uiso 1 1 d DU . .
O2 O 0.769(3) 0.2859(18) 0.221(3) 0.21(3) Uiso 1 1 d DU . .
P2 P 0.800(2) 0.2184(15) 0.239(2) 0.25(3) Uiso 0.77(10) 1 d PDU . .
O5 O 0.770(2) 0.168(3) 0.197(3) 0.27(4) Uiso 1 1 d DU . .
W2 W 0.6654(5) 0.1615(5) 0.1470(5) 0.249(4) Uani 1 1 d DU . .
W3 W 0.5398(5) 0.0675(5) 0.2255(5) 0.257(4) Uani 1 1 d DU . .
O8 O 0.607(2) 0.055(3) 0.3017(13) 0.19(3) Uiso 1 1 d DU . .
P3 P 0.590(2) 0.053(2) 0.3649(14) 0.27(3) Uiso 0.88(7) 1 d PDU . .
O10 O 0.533(3) 0.098(4) 0.3723(19) 0.32(4) Uiso 1 1 d DU . .
W4 W 0.4507(5) 0.1439(6) 0.3122(5) 0.255(4) Uani 1 1 d DU . .
W5 W 0.4855(5) 0.3164(5) 0.3485(4) 0.227(4) Uani 1 1 d DU . .
O13 O 0.5682(18) 0.336(3) 0.4118(15) 0.14(2) Uiso 1 1 d DU . .
P4 P 0.635(2) 0.381(3) 0.4135(13) 0.14(2) Uiso 0.28(5) 1 d PDU . .
O15 O 0.657(2) 0.380(3) 0.3558(14) 0.13(2) Uiso 1 1 d DU . .
W6 W 0.5896(5) 0.4031(5) 0.2748(4) 0.236(4) Uani 1 1 d DU . .
W7 W 0.4870(5) 0.3394(5) 0.1326(4) 0.199(3) Uani 1 1 d DU . .
W8 W 0.4629(5) 0.1828(5) 0.1050(4) 0.213(3) Uani 1 1 d DU . .
W9 W 0.3765(5) 0.2568(4) 0.2011(4) 0.185(3) Uani 1 1 d U . .
W10 W 0.5983(4) 0.3175(4) 0.7392(3) 0.154(2) Uani 1 1 d DU . .
O38 O 0.517(3) 0.2778(18) 0.684(3) 0.21(3) Uiso 1 1 d DU . .
P6 P 0.4872(17) 0.2093(14) 0.6685(16) 0.24(2) Uiso 1.40(10) 1 d PDU .
.
O120 O 0.533(3) 0.156(2) 0.693(2) 0.18(3) Uiso 1 1 d DU . .
W11 W 0.6207(5) 0.1587(4) 0.7631(4) 0.181(3) Uani 1 1 d DU . .
W12 W 0.7359(5) 0.0681(5) 0.6915(4) 0.203(3) Uani 1 1 d DU . .
O70 O 0.688(4) 0.033(3) 0.568(3) 0.19(3) Uiso 1 1 d DU . .
P7 P 0.667(2) 0.095(3) 0.532(3) 0.29(4) Uiso 0.65(10) 1 d PDU . .
O46 O 0.731(3) 0.134(4) 0.528(2) 0.29(4) Uiso 1 1 d DU . .
W13 W 0.8251(5) 0.1448(5) 0.5926(4) 0.203(3) Uani 1 1 d DU . .
W14 W 0.7966(4) 0.3128(4) 0.5627(3) 0.175(3) Uani 1 1 d U . .
W15 W 0.6888(4) 0.3991(4) 0.6311(3) 0.176(3) Uani 1 1 d DU . .
W16 W 0.7927(4) 0.3435(3) 0.7805(3) 0.137(2) Uani 1 1 d DU . .
W17 W 0.8172(5) 0.1797(4) 0.8060(4) 0.162(3) Uani 1 1 d DU . .
W18 W 0.9021(5) 0.2565(3) 0.7071(4) 0.144(2) Uani 1 1 d U . .
O6A O 0.624(3) 0.097(2) 0.192(2) 0.102(16) Uiso 1 1 d U . .
O20 O 0.572(3) 0.268(2) 0.276(2) 0.084(16) Uiso 1 1 d U . .
O19 O 0.548(3) 0.172(3) 0.274(2) 0.108(19) Uiso 1 1 d U . .
O53A O 0.735(3) 0.190(3) 0.665(2) 0.083(16) Uiso 1 1 d U . .
O54A O 0.722(3) 0.299(3) 0.618(2) 0.094(16) Uiso 1 1 d U . .
```

```
O55A O 0.647(4) 0.251(3) 0.699(3) 0.16(2) Uiso 1 1 d U . .
P1 P 0.531(3) 0.257(3) 0.211(2) 0.217(18) Uiso 1 1 d U . .
O408 O 0.493(4) 0.193(4) 0.612(4) 0.27(4) Uiso 1.40(10) 1 d PU . .
O413 O 0.741(4) 0.368(4) 0.112(4) 0.22(3) Uiso 1 1 d U . .
O412 O 0.292(3) 0.272(2) 0.188(2) 0.102(17) Uiso 1 1 d U . .
C3 C 0.633(6) 0.438(3) 0.450(4) 0.10(2) Uiso 1 1 d U . .
C4 C 0.713(4) 0.465(3) 0.444(3) 0.09(2) Uiso 1 1 d U . .
C1 C 0.918(8) 0.218(7) 0.266(6) 0.23(6) Uiso 1 1 d U . .
C5 C 0.400(5) 0.192(5) 0.719(4) 0.16(4) Uiso 1 1 d U . .
C2 C 0.555(6) -0.059(5) 0.347(5) 0.18(4) Uiso 1 1 d U . .

loop_
 _atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
 _atom_site_aniso_U_23
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_12
W2 0.184(6) 0.329(11) 0.237(8) 0.067(7) 0.048(6) 0.120(7)
W3 0.189(7) 0.319(11) 0.257(8) 0.076(7) 0.029(6) 0.092(7)
W4 0.158(7) 0.373(12) 0.232(8) 0.039(7) 0.033(6) 0.009(7)
W5 0.116(5) 0.426(12) 0.130(5) -0.050(6) -0.001(4) -0.032(6)
W6 0.139(6) 0.374(12) 0.192(6) -0.092(7) 0.028(5) -0.046(7)
W7 0.172(6) 0.279(8) 0.135(5) 0.001(5) -0.004(4) -0.011(6)
W8 0.170(6) 0.281(8) 0.159(5) -0.045(5) -0.041(5) 0.063(6)
W9 0.112(5) 0.245(8) 0.183(5) -0.053(5) -0.009(4) -0.022(5)
W10 0.098(3) 0.289(7) 0.073(3) 0.018(4) 0.014(2) -0.010(4)
W11 0.129(5) 0.250(7) 0.156(5) -0.012(5) 0.009(4) -0.038(5)
W12 0.180(7) 0.221(9) 0.208(7) -0.045(6) 0.036(6) -0.028(6)
W13 0.153(6) 0.267(8) 0.191(6) -0.076(6) 0.038(5) -0.060(6)
W14 0.100(4) 0.328(8) 0.100(4) 0.049(5) 0.027(3) 0.025(5)
W15 0.110(4) 0.336(10) 0.087(3) 0.066(4) 0.035(3) 0.057(5)
W16 0.140(4) 0.179(5) 0.080(3) 0.022(3) -0.010(3) -0.047(4)
W17 0.130(5) 0.199(7) 0.146(5) 0.028(4) -0.006(4) -0.002(5)
W18 0.108(4) 0.199(7) 0.107(3) 0.013(3) -0.028(3) -0.017(4)

_geom_special_details
;
 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s.
planes)
 are estimated using the full covariance matrix.  The cell esds are
taken
 into account individually in the estimation of esds in distances,
angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are
only
 used when they are defined by crystal symmetry.  An approximate
(isotropic)
 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s.
planes.
;

loop_
 _geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
O3 W1 1.58(9) . ?
O3 W2 2.08(9) . ?
O4 W2 1.69(4) . ?
O7 W3 1.69(4) . ?
O9 W3 1.67(6) . ?
O9 W4 2.33(6) . ?
O12 W5 1.66(5) . ?
```

```
O14 W5 1.22(6) . ?
O14 W6 2.30(6) . ?
O16 W6 1.61(4) . ?
O16 O26 1.57(8) . ?
O17 W6 1.85(5) . ?
O17 W1 2.20(5) . ?
O17A W4 1.52(6) . ?
O21 W1 1.87(6) . ?
O21 W7 2.29(6) . ?
O22 W2 1.55(10) . ?
O22 W8 2.49(9) . ?
O23 W3 1.85(5) . ?
O23 W8 2.16(5) . ?
O24 W9 1.90(12) . ?
O24 W4 1.91(12) . ?
O25 W9 1.87(4) . ?
O25 W5 2.06(4) . ?
O26 W7 1.81(4) . ?
O26 W6 2.00(4) . ?
O27 W7 1.32(10) . ?
O28 W8 1.92(4) . ?
O28 W7 2.03(4) . ?
O29 W8 1.65(5) . ?
O30 W9 2.07(9) . ?
O30 W8 1.91(9) . ?
O32 W9 1.48(8) . ?
O32 W7 2.21(8) . ?
O33 P1 0.96(6) . ?
O33 W8 2.27(5) . ?
O33 W9 2.64(5) . ?
O35 P3 1.26(7) . ?
O37 W10 1.65(7) . ?
O39 W10 1.69(7) . ?
O39 W15 2.17(7) . ?
O40 W15 1.43(7) . ?
O41 W15 1.66(4) . ?
O42 W15 1.81(5) . ?
O42 W14 2.38(5) . ?
O43 W14 1.84(5) . ?
O44 W14 1.94(6) . ?
O45 W13 1.81(6) . ?
O45 W14 1.90(7) . ?
O47 W13 1.99(14) . ?
O48 W13 1.22(3) . ?
O49 W12 1.42(4) . ?
O51 W11 1.57(4) . ?
O52 W10 1.93(6) . ?
O52 W11 2.07(6) . ?
O56 P5 1.88(7) . ?
O56 W18 2.17(8) . ?
O56 W16 2.31(7) . ?
O57 W10 1.97(5) . ?
O57 W16 1.93(4) . ?
O58 W16 1.88(4) . ?
O58 W15 2.24(4) . ?
O59 W18 2.18(6) . ?
O59 W14 2.14(6) . ?
O60 W13 1.74(8) . ?
O60 W18 2.14(8) . ?
O61 W12 1.58(7) . ?
O61 W17 2.13(8) . ?
O62 O68 1.14(9) . ?
O62 W17 1.95(7) . ?
O62 W11 1.87(7) . ?
O63 W16 1.73(4) . ?
O64 W16 1.94(6) . ?
```

```
O64 W18 1.98(5) . ?
O65 W18 1.97(7) . ?
O66 W17 1.83(8) . ?
O66 W18 2.08(8) . ?
O67 W17 1.68(4) . ?
O68 W17 0.86(9) . ?
O18 P1 2.04(8) . ?
O18 W2 2.23(5) . ?
P5 O53A 1.03(5) . ?
P5 O55A 1.64(8) . ?
P5 O54A 1.78(6) . ?
W1 O2 2.01(3) . ?
W1 O413 2.16(8) . ?
O2 P2 1.56(3) . ?
P2 O5 1.49(3) . ?
P2 C1 2.23(16) . ?
O5 W2 2.12(3) . ?
W2 O6A 1.97(5) . ?
W3 O8 2.01(3) . ?
W3 O6A 2.03(5) . ?
W3 O19 2.44(5) . ?
O8 P3 1.57(3) . ?
P3 O10 1.48(3) . ?
P3 C2 2.44(12) . ?
O10 W4 2.13(3) . ?
W4 O19 2.30(5) . ?
W5 O13 2.00(3) . ?
O13 P4 1.58(3) . ?
P4 O15 1.49(3) . ?
P4 C3 1.49(10) . ?
O15 W6 2.14(3) . ?
W7 P1 2.54(6) . ?
W8 P1 3.02(6) . ?
W9 O412 1.62(5) . ?
W10 O38 2.01(3) . ?
W10 O55A 2.01(7) . ?
O38 P6 1.56(3) . ?
P6 O408 1.41(8) . ?
P6 O120 1.47(3) . ?
P6 C5 2.25(15) . ?
O120 W11 2.12(3) . ?
O70 P7 1.57(3) . ?
P7 O46 1.49(3) . ?
O46 W13 2.14(3) . ?
W14 O54A 2.12(6) . ?
W15 O54A 2.23(6) . ?
O20 P1 1.60(7) . ?
C3 C4 1.66(13) . ?

loop_
 _geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
W1 O3 W2 130(5) . . ?
W3 O9 W4 111(3) . . ?
W5 O14 W6 148(4) . . ?
W6 O16 O26 78(3) . . ?
W6 O17 W1 137(3) . . ?
W1 O21 W7 124(3) . . ?
W2 O22 W8 143(5) . . ?
W3 O23 W8 143(3) . . ?
W9 O24 W4 142(6) . . ?
```

W9 O25 W5 165(2) . . ?
O16 O26 W7 116(4) . . ?
O16 O26 W6 52.1(17) . . ?
W7 O26 W6 168(4) . . ?
W8 O28 W7 116.3(18) . . ?
W9 O30 W8 118(5) . . ?
W9 O32 W7 131(4) . . ?
P1 O33 W8 134(6) . . ?
P1 O33 W9 98(6) . . ?
W8 O33 W9 87.6(17) . . ?
W10 O39 W15 152(4) . . ?
W15 O42 W14 106(2) . . ?
W13 O45 W14 153(3) . . ?
W10 O52 W11 115(3) . . ?
P5 O56 W18 125(4) . . ?
P5 O56 W16 120(4) . . ?
W18 O56 W16 101(3) . . ?
W10 O57 W16 143(4) . . ?
W16 O58 W15 140(2) . . ?
W18 O59 W14 123(3) . . ?
W13 O60 W18 141(5) . . ?
W12 O61 W17 163(4) . . ?
O68 O62 W17 11(5) . . ?
O68 O62 W11 151(7) . . ?
W17 O62 W11 156(3) . . ?
W16 O64 W18 125(3) . . ?
W17 O66 W18 125(4) . . ?
W17 O68 O62 155(10) . . ?
P1 O18 W2 125(3) . . ?
O53A P5 O55A 124(4) . . ?
O53A P5 O54A 126(4) . . ?
O55A P5 O54A 109(3) . . ?
O53A P5 O56 86(4) . . ?
O55A P5 O56 102(4) . . ?
O54A P5 O56 96(3) . . ?
O3 W1 O21 84(3) . . ?
O3 W1 O2 73(3) . . ?
O21 W1 O2 152.7(18) . . ?
O3 W1 O413 87(3) . . ?
O21 W1 O413 99(2) . . ?
O2 W1 O413 94(3) . . ?
O3 W1 O17 162(3) . . ?
O21 W1 O17 105(2) . . ?
O2 W1 O17 94(2) . . ?
O413 W1 O17 106(2) . . ?
P2 O2 W1 135(2) . . ?
O5 P2 O2 113(3) . . ?
O5 P2 C1 115(5) . . ?
O2 P2 C1 113(5) . . ?
P2 O5 W2 128(3) . . ?
O22 W2 O4 98(3) . . ?
O22 W2 O6A 97(4) . . ?
O4 W2 O6A 91.3(19) . . ?
O22 W2 O3 87(4) . . ?
O4 W2 O3 119(3) . . ?
O6A W2 O3 149(2) . . ?
O22 W2 O5 158(4) . . ?
O4 W2 O5 96.2(19) . . ?
O6A W2 O5 100(3) . . ?
O3 W2 O5 71(2) . . ?
O22 W2 O18 83(4) . . ?
O4 W2 O18 168.6(19) . . ?
O6A W2 O18 77(2) . . ?
O3 W2 O18 73(3) . . ?
O5 W2 O18 87(2) . . ?
O9 W3 O7 72(3) . . ?

```
O9 W3 O23 82(3) . . ?
O7 W3 O23 109(3) . . ?
O9 W3 O8 93(2) . . ?
O7 W3 O8 89(3) . . ?
O23 W3 O8 159(3) . . ?
O9 W3 O6A 170(2) . . ?
O7 W3 O6A 118(3) . . ?
O23 W3 O6A 94(2) . . ?
O8 W3 O6A 88(2) . . ?
O9 W3 O19 85(2) . . ?
O7 W3 O19 151(3) . . ?
O23 W3 O19 85(2) . . ?
O8 W3 O19 74(2) . . ?
O6A W3 O19 85.5(19) . . ?
P3 O8 W3 129(3) . . ?
O35 P3 O10 127(4) . . ?
O35 P3 O8 115(4) . . ?
O10 P3 O8 112(3) . . ?
O35 P3 C2 88(5) . . ?
O10 P3 C2 117(5) . . ?
O8 P3 C2 88(4) . . ?
P3 O10 W4 133(3) . . ?
O17A W4 O24 114(3) . . ?
O17A W4 O10 83(2) . . ?
O24 W4 O10 161(3) . . ?
O17A W4 O19 162(2) . . ?
O24 W4 O19 84(3) . . ?
O10 W4 O19 80(2) . . ?
O17A W4 O9 103(3) . . ?
O24 W4 O9 84(3) . . ?
O10 W4 O9 82(2) . . ?
O19 W4 O9 75.9(16) . . ?
O14 W5 O12 110(4) . . ?
O14 W5 O13 85(3) . . ?
O12 W5 O13 83(3) . . ?
O14 W5 O25 89(3) . . ?
O12 W5 O25 110(3) . . ?
O13 W5 O25 167.1(18) . . ?
P4 O13 W5 132(3) . . ?
O15 P4 C3 125(5) . . ?
O15 P4 O13 110(3) . . ?
C3 P4 O13 112(6) . . ?
P4 O15 W6 126(3) . . ?
O16 W6 O17 60(3) . . ?
O16 W6 O26 50(3) . . ?
O17 W6 O26 78(2) . . ?
O16 W6 O15 153(3) . . ?
O17 W6 O15 95.8(15) . . ?
O26 W6 O15 141(3) . . ?
O16 W6 O14 126(3) . . ?
O17 W6 O14 150(2) . . ?
O26 W6 O14 86(2) . . ?
O15 W6 O14 80.3(14) . . ?
O27 W7 O26 133(4) . . ?
O27 W7 O28 78(4) . . ?
O26 W7 O28 146(3) . . ?
O27 W7 O21 95(4) . . ?
O26 W7 O21 87(2) . . ?
O28 W7 O21 74.8(15) . . ?
O27 W7 O32 107(4) . . ?
O26 W7 O32 97(3) . . ?
O28 W7 O32 82(2) . . ?
O21 W7 O32 143(2) . . ?
O27 W7 P1 166(4) . . ?
O26 W7 P1 58(3) . . ?
O28 W7 P1 89.2(17) . . ?
```

```
O21 W7 P1 74.8(15) . . ?
O32 W7 P1 77(2) . . ?
O29 W8 O28 72(5) . . ?
O29 W8 O30 122(6) . . ?
O28 W8 O30 103(3) . . ?
O29 W8 O23 128(5) . . ?
O28 W8 O23 158.9(18) . . ?
O30 W8 O23 73(3) . . ?
O29 W8 O33 157(5) . . ?
O28 W8 O33 91.0(17) . . ?
O30 W8 O33 76(3) . . ?
O23 W8 O33 67.9(19) . . ?
O29 W8 O22 86(5) . . ?
O28 W8 O22 85(2) . . ?
O30 W8 O22 151(3) . . ?
O23 W8 O22 91(2) . . ?
O33 W8 O22 76(2) . . ?
O29 W8 P1 144(5) . . ?
O28 W8 P1 78.4(15) . . ?
O30 W8 P1 83(3) . . ?
O23 W8 P1 80.6(17) . . ?
O33 W8 P1 13.3(16) . . ?
O22 W8 P1 71(2) . . ?
O32 W9 O412 91(3) . . ?
O32 W9 O24 153(4) . . ?
O412 W9 O24 112(4) . . ?
O32 W9 O25 105(3) . . ?
O412 W9 O25 109(2) . . ?
O24 W9 O25 82(4) . . ?
O32 W9 O30 90(4) . . ?
O412 W9 O30 101(3) . . ?
O24 W9 O30 72(4) . . ?
O25 W9 O30 146(3) . . ?
O32 W9 O33 85(3) . . ?
O412 W9 O33 166(2) . . ?
O24 W9 O33 69(4) . . ?
O25 W9 O33 85.0(16) . . ?
O30 W9 O33 66(3) . . ?
O37 W10 O39 109(3) . . ?
O37 W10 O52 102(3) . . ?
O39 W10 O52 149(3) . . ?
O37 W10 O57 90(3) . . ?
O39 W10 O57 92(3) . . ?
O52 W10 O57 88(3) . . ?
O37 W10 O38 105(3) . . ?
O39 W10 O38 82(3) . . ?
O52 W10 O38 90(3) . . ?
O57 W10 O38 165(3) . . ?
O37 W10 O55A 177(3) . . ?
O39 W10 O55A 68(3) . . ?
O52 W10 O55A 81(3) . . ?
O57 W10 O55A 88(3) . . ?
O38 W10 O55A 77(3) . . ?
P6 O38 W10 137(3) . . ?
O408 P6 O120 92(5) . . ?
O408 P6 O38 111(5) . . ?
O120 P6 O38 117(3) . . ?
O408 P6 C5 132(5) . . ?
O120 P6 C5 97(5) . . ?
O38 P6 C5 108(6) . . ?
P6 O120 W11 127(3) . . ?
O51 W11 O62 116(3) . . ?
O51 W11 O120 85(3) . . ?
O62 W11 O120 158(3) . . ?
O51 W11 O52 97(3) . . ?
O62 W11 O52 90(2) . . ?
```

O120 W11 O52 95(2) . . ?
O49 W12 O61 103(3) . . ?
O46 P7 O70 111(3) . . ?
P7 O46 W13 127(3) . . ?
O48 W13 O60 102(3) . . ?
O48 W13 O45 145(2) . . ?
O60 W13 O45 97(3) . . ?
O48 W13 O47 90(4) . . ?
O60 W13 O47 95(4) . . ?
O45 W13 O47 117(4) . . ?
O48 W13 O46 77(2) . . ?
O60 W13 O46 155(4) . . ?
O45 W13 O46 74(3) . . ?
O47 W13 O46 110(5) . . ?
O43 W14 O44 112(2) . . ?
O43 W14 O45 77(2) . . ?
O44 W14 O45 99(2) . . ?
O43 W14 O54A 79(2) . . ?
O44 W14 O54A 168(2) . . ?
O45 W14 O54A 89(2) . . ?
O43 W14 O59 164(2) . . ?
O44 W14 O59 84(2) . . ?
O45 W14 O59 98(2) . . ?
O54A W14 O59 86(2) . . ?
O43 W14 O42 108(2) . . ?
O44 W14 O42 100(2) . . ?
O45 W14 O42 156(2) . . ?
O54A W14 O42 69.7(19) . . ?
O59 W14 O42 70.8(19) . . ?
O40 W15 O41 80(4) . . ?
O40 W15 O42 108(3) . . ?
O41 W15 O42 91(3) . . ?
O40 W15 O39 87(3) . . ?
O41 W15 O39 114(3) . . ?
O42 W15 O39 153(2) . . ?
O40 W15 O58 173(3) . . ?
O41 W15 O58 102(3) . . ?
O42 W15 O58 78.3(17) . . ?
O39 W15 O58 86(2) . . ?
O40 W15 O54A 95(3) . . ?
O41 W15 O54A 167(3) . . ?
O42 W15 O54A 79(2) . . ?
O39 W15 O54A 78(2) . . ?
O58 W15 O54A 84.1(18) . . ?
O63 W16 O58 96(2) . . ?
O63 W16 O64 107(2) . . ?
O58 W16 O64 89(2) . . ?
O63 W16 O57 90(3) . . ?
O58 W16 O57 89(2) . . ?
O64 W16 O57 163(3) . . ?
O63 W16 O56 172(3) . . ?
O58 W16 O56 88(2) . . ?
O64 W16 O56 66(3) . . ?
O57 W16 O56 97(3) . . ?
O68 W17 O67 114(8) . . ?
O68 W17 O66 146(9) . . ?
O67 W17 O66 100(3) . . ?
O68 W17 O62 15(9) . . ?
O67 W17 O62 103(3) . . ?
O66 W17 O62 156(3) . . ?
O68 W17 O61 75(9) . . ?
O67 W17 O61 103(3) . . ?
O66 W17 O61 103(3) . . ?
O62 W17 O61 67(3) . . ?
O65 W18 O64 113(3) . . ?
O65 W18 O59 100(2) . . ?

```
O64 W18 O59 85(2) . . ?
O65 W18 O66 99(3) . . ?
O64 W18 O66 80(3) . . ?
O59 W18 O66 159(3) . . ?
O65 W18 O56 170(3) . . ?
O64 W18 O56 68(3) . . ?
O59 W18 O56 90(2) . . ?
O66 W18 O56 71(3) . . ?
O65 W18 O60 92(3) . . ?
O64 W18 O60 154(3) . . ?
O59 W18 O60 102(3) . . ?
O66 W18 O60 86(3) . . ?
O56 W18 O60 86(3) . . ?
W2 O6A W3 148(3) . . ?
W4 O19 W3 88.2(19) . . ?
P5 O54A W14 130(3) . . ?
P5 O54A W15 124(3) . . ?
W14 O54A W15 101(2) . . ?
P5 O55A W10 147(4) . . ?
O33 P1 O20 125(6) . . ?
O33 P1 O18 95(6) . . ?
O20 P1 O18 73(3) . . ?
O33 P1 W7 103(6) . . ?
O20 P1 W7 130(4) . . ?
O18 P1 W7 119(3) . . ?
O33 P1 W8 33(4) . . ?
O20 P1 W8 156(4) . . ?
O18 P1 W8 96(2) . . ?
W7 P1 W8 73.8(15) . . ?
P4 C3 C4 95(7) . . ?

loop_
 _geom_torsion_atom_site_label_1
 _geom_torsion_atom_site_label_2
 _geom_torsion_atom_site_label_3
 _geom_torsion_atom_site_label_4
 _geom_torsion
 _geom_torsion_site_symmetry_1
 _geom_torsion_site_symmetry_2
 _geom_torsion_site_symmetry_3
 _geom_torsion_site_symmetry_4
 _geom_torsion_publ_flag
W6 O16 O26 W7 179(4) . . . . ?
W11 O62 O68 W17 -126(21) . . . . ?
W18 O56 P5 O53A 64(5) . . . . ?
W16 O56 P5 O53A -163(5) . . . . ?
W18 O56 P5 O55A -173(4) . . . . ?
W16 O56 P5 O55A -39(5) . . . . ?
W18 O56 P5 O54A -62(5) . . . . ?
W16 O56 P5 O54A 71(4) . . . . ?
W2 O3 W1 O21 -68(6) . . . . ?
W2 O3 W1 O2 97(6) . . . . ?
W2 O3 W1 O413 -168(6) . . . . ?
W2 O3 W1 O17 54(12) . . . . ?
W7 O21 W1 O3 148(4) . . . . ?
W7 O21 W1 O2 117(6) . . . . ?
W7 O21 W1 O413 -125(3) . . . . ?
W7 O21 W1 O17 -16(4) . . . . ?
W6 O17 W1 O3 -70(10) . . . . ?
W6 O17 W1 O21 50(5) . . . . ?
W6 O17 W1 O2 -111(4) . . . . ?
W6 O17 W1 O413 154(4) . . . . ?
O3 W1 O2 P2 -32(8) . . . . ?
O21 W1 O2 P2 0(13) . . . . ?
O413 W1 O2 P2 -118(8) . . . . ?
O17 W1 O2 P2 135(8) . . . . ?
```

W1 O2 P2 O5 20(12) . . . . ?
W1 O2 P2 C1 153(7) . . . . ?
O2 P2 O5 W2 -34(10) . . . . ?
C1 P2 O5 W2 -166(6) . . . . ?
W8 O22 W2 O4 108(8) . . . . ?
W8 O22 W2 O6A 16(8) . . . . ?
W8 O22 W2 O3 -133(8) . . . . ?
W8 O22 W2 O5 -123(10) . . . . ?
W8 O22 W2 O18 -60(8) . . . . ?
W1 O3 W2 O22 68(6) . . . . ?
W1 O3 W2 O4 165(5) . . . . ?
W1 O3 W2 O6A -30(9) . . . . ?
W1 O3 W2 O5 -108(6) . . . . ?
W1 O3 W2 O18 -16(5) . . . . ?
P2 O5 W2 O22 36(15) . . . . ?
P2 O5 W2 O4 165(7) . . . . ?
P2 O5 W2 O6A -103(7) . . . . ?
P2 O5 W2 O3 46(7) . . . . ?
P2 O5 W2 O18 -26(7) . . . . ?
P1 O18 W2 O22 11(5) . . . . ?
P1 O18 W2 O4 -84(14) . . . . ?
P1 O18 W2 O6A -87(4) . . . . ?
P1 O18 W2 O3 100(3) . . . . ?
P1 O18 W2 O5 171(4) . . . . ?
W4 O9 W3 O7 159(4) . . . . ?
W4 O9 W3 O23 -88(3) . . . . ?
W4 O9 W3 O8 71(3) . . . . ?
W4 O9 W3 O6A -25(15) . . . . ?
W4 O9 W3 O19 -2(2) . . . . ?
W8 O23 W3 O9 149(5) . . . . ?
W8 O23 W3 O7 -143(5) . . . . ?
W8 O23 W3 O8 72(8) . . . . ?
W8 O23 W3 O6A -22(5) . . . . ?
W8 O23 W3 O19 63(5) . . . . ?
O9 W3 O8 P3 -12(6) . . . . ?
O7 W3 O8 P3 -84(6) . . . . ?
O23 W3 O8 P3 63(10) . . . . ?
O6A W3 O8 P3 159(6) . . . . ?
O19 W3 O8 P3 73(6) . . . . ?
W3 O8 P3 O35 168(6) . . . . ?
W3 O8 P3 O10 -37(9) . . . . ?
W3 O8 P3 C2 81(6) . . . . ?
O35 P3 O10 W4 172(7) . . . . ?
O8 P3 O10 W4 22(11) . . . . ?
C2 P3 O10 W4 -77(9) . . . . ?
W9 O24 W4 O17A 113(10) . . . . ?
W9 O24 W4 O10 -100(16) . . . . ?
W9 O24 W4 O19 -69(10) . . . . ?
W9 O24 W4 O9 -146(10) . . . . ?
P3 O10 W4 O17A 127(9) . . . . ?
P3 O10 W4 O24 -23(20) . . . . ?
P3 O10 W4 O19 -54(9) . . . . ?
P3 O10 W4 O9 23(9) . . . . ?
W3 O9 W4 O17A -159(3) . . . . ?
W3 O9 W4 O24 88(4) . . . . ?
W3 O9 W4 O10 -78(3) . . . . ?
W3 O9 W4 O19 3(3) . . . . ?
W6 O14 W5 O12 153(7) . . . . ?
W6 O14 W5 O13 72(7) . . . . ?
W6 O14 W5 O25 -96(7) . . . . ?
W9 O25 W5 O14 91(10) . . . . ?
W9 O25 W5 O12 -158(9) . . . . ?
W9 O25 W5 O13 27(17) . . . . ?
O14 W5 O13 P4 -14(6) . . . . ?
O12 W5 O13 P4 -124(6) . . . . ?
O25 W5 O13 P4 51(14) . . . . ?

```
W5 O13 P4 O15 -33(8) . . . . ?
W5 O13 P4 C3 111(6) . . . . ?
C3 P4 O15 W6 -83(7) . . . . ?
O13 P4 O15 W6 55(7) . . . . ?
O26 O16 W6 O17 100(4) . . . . ?
O26 O16 W6 O15 128(5) . . . . ?
O26 O16 W6 O14 -44(5) . . . . ?
W1 O17 W6 O16 -85(5) . . . . ?
W1 O17 W6 O26 -34(4) . . . . ?
W1 O17 W6 O15 107(4) . . . . ?
W1 O17 W6 O14 26(6) . . . . ?
W7 O26 W6 O16 -2(20) . . . . ?
O16 O26 W6 O17 -61(4) . . . . ?
W7 O26 W6 O17 -63(21) . . . . ?
O16 O26 W6 O15 -145(4) . . . . ?
W7 O26 W6 O15 -147(20) . . . . ?
O16 O26 W6 O14 146(4) . . . . ?
W7 O26 W6 O14 143(22) . . . . ?
P4 O15 W6 O16 156(6) . . . . ?
P4 O15 W6 O17 180(4) . . . . ?
P4 O15 W6 O26 -102(5) . . . . ?
P4 O15 W6 O14 -31(4) . . . . ?
W5 O14 W6 O16 117(8) . . . . ?
W5 O14 W6 O17 25(10) . . . . ?
W5 O14 W6 O26 84(7) . . . . ?
W5 O14 W6 O15 -60(7) . . . . ?
O16 O26 W7 O27 -16(8) . . . . ?
W6 O26 W7 O27 -14(24) . . . . ?
O16 O26 W7 O28 135(3) . . . . ?
W6 O26 W7 O28 137(20) . . . . ?
O16 O26 W7 O21 78(4) . . . . ?
W6 O26 W7 O21 80(21) . . . . ?
O16 O26 W7 O32 -138(4) . . . . ?
W6 O26 W7 O32 -136(21) . . . . ?
O16 O26 W7 P1 152(5) . . . . ?
W6 O26 W7 P1 154(22) . . . . ?
W8 O28 W7 O27 -171(4) . . . . ?
W8 O28 W7 O26 30(5) . . . . ?
W8 O28 W7 O21 89.7(18) . . . . ?
W8 O28 W7 O32 -62(3) . . . . ?
W8 O28 W7 P1 15(2) . . . . ?
W1 O21 W7 O27 128(4) . . . . ?
W1 O21 W7 O26 -5(3) . . . . ?
W1 O21 W7 O28 -156(4) . . . . ?
W1 O21 W7 O32 -103(4) . . . . ?
W1 O21 W7 P1 -62(3) . . . . ?
W9 O32 W7 O27 165(6) . . . . ?
W9 O32 W7 O26 -55(6) . . . . ?
W9 O32 W7 O28 91(5) . . . . ?
W9 O32 W7 O21 40(7) . . . . ?
W9 O32 W7 P1 0(5) . . . . ?
W7 O28 W8 O29 -172(6) . . . . ?
W7 O28 W8 O30 67(3) . . . . ?
W7 O28 W8 O23 -7(6) . . . . ?
W7 O28 W8 O33 -9(2) . . . . ?
W7 O28 W8 O22 -85(3) . . . . ?
W7 O28 W8 P1 -13.1(19) . . . . ?
W9 O30 W8 O29 -132(7) . . . . ?
W9 O30 W8 O28 -55(5) . . . . ?
W9 O30 W8 O23 104(5) . . . . ?
W9 O30 W8 O33 33(4) . . . . ?
W9 O30 W8 O22 48(10) . . . . ?
W9 O30 W8 P1 22(4) . . . . ?
W3 O23 W8 O29 103(8) . . . . ?
W3 O23 W8 O28 -59(8) . . . . ?
W3 O23 W8 O30 -139(6) . . . . ?
```

```
W3 O23 W8 O33 -57(5) . . . . ?
W3 O23 W8 O22 18(5) . . . . ?
W3 O23 W8 P1 -53(5) . . . . ?
P1 O33 W8 O29 25(16) . . . . ?
W9 O33 W8 O29 124(13) . . . . ?
P1 O33 W8 O28 -18(8) . . . . ?
W9 O33 W8 O28 80.3(16) . . . . ?
P1 O33 W8 O30 -121(8) . . . . ?
W9 O33 W8 O30 -22(3) . . . . ?
P1 O33 W8 O23 162(8) . . . . ?
W9 O33 W8 O23 -98.9(19) . . . . ?
P1 O33 W8 O22 66(8) . . . . ?
W9 O33 W8 O22 165(3) . . . . ?
W9 O33 W8 P1 99(8) . . . . ?
W2 O22 W8 O29 -142(9) . . . . ?
W2 O22 W8 O28 145(8) . . . . ?
W2 O22 W8 O30 38(13) . . . . ?
W2 O22 W8 O23 -14(8) . . . . ?
W2 O22 W8 O33 53(8) . . . . ?
W2 O22 W8 P1 66(8) . . . . ?
W7 O32 W9 O412 177(5) . . . . ?
W7 O32 W9 O24 -36(12) . . . . ?
W7 O32 W9 O25 66(5) . . . . ?
W7 O32 W9 O30 -83(5) . . . . ?
W7 O32 W9 O33 -17(5) . . . . ?
W4 O24 W9 O32 97(12) . . . . ?
W4 O24 W9 O412 -120(9) . . . . ?
W4 O24 W9 O25 -12(10) . . . . ?
W4 O24 W9 O30 146(11) . . . . ?
W4 O24 W9 O33 76(10) . . . . ?
W5 O25 W9 O32 -95(10) . . . . ?
W5 O25 W9 O412 169(9) . . . . ?
W5 O25 W9 O24 58(10) . . . . ?
W5 O25 W9 O30 18(12) . . . . ?
W5 O25 W9 O33 -11(9) . . . . ?
W8 O30 W9 O32 54(5) . . . . ?
W8 O30 W9 O412 145(4) . . . . ?
W8 O30 W9 O24 -105(6) . . . . ?
W8 O30 W9 O25 -63(7) . . . . ?
W8 O30 W9 O33 -30(4) . . . . ?
P1 O33 W9 O32 64(6) . . . . ?
W8 O33 W9 O32 -70(3) . . . . ?
P1 O33 W9 O412 136(9) . . . . ?
W8 O33 W9 O412 2(10) . . . . ?
P1 O33 W9 O24 -125(7) . . . . ?
W8 O33 W9 O24 101(4) . . . . ?
P1 O33 W9 O25 -42(6) . . . . ?
W8 O33 W9 O25 -175.5(19) . . . . ?
P1 O33 W9 O30 156(7) . . . . ?
W8 O33 W9 O30 22(3) . . . . ?
W15 O39 W10 O37 79(9) . . . . ?
W15 O39 W10 O52 -100(11) . . . . ?
W15 O39 W10 O57 -12(9) . . . . ?
W15 O39 W10 O38 -178(9) . . . . ?
W15 O39 W10 O55A -99(9) . . . . ?
W11 O52 W10 O37 169(3) . . . . ?
W11 O52 W10 O39 -12(8) . . . . ?
W11 O52 W10 O57 -102(3) . . . . ?
W11 O52 W10 O38 64(4) . . . . ?
W11 O52 W10 O55A -13(3) . . . . ?
W16 O57 W10 O37 -147(6) . . . . ?
W16 O57 W10 O39 -38(6) . . . . ?
W16 O57 W10 O52 111(6) . . . . ?
W16 O57 W10 O38 28(18) . . . . ?
W16 O57 W10 O55A 30(6) . . . . ?
O37 W10 O38 P6 -130(8) . . . . ?
```

O39 W10 O38 P6 122(9) . . . . ?
O52 W10 O38 P6 -28(9) . . . . ?
O57 W10 O38 P6 55(19) . . . . ?
O55A W10 O38 P6 53(8) . . . . ?
W10 O38 P6 O408 -115(8) . . . . ?
W10 O38 P6 O120 -12(12) . . . . ?
W10 O38 P6 C5 95(9) . . . . ?
O408 P6 O120 W11 132(6) . . . . ?
O38 P6 O120 W11 17(9) . . . . ?
C5 P6 O120 W11 -96(7) . . . . ?
O68 O62 W11 O51 172(14) . . . . ?
W17 O62 W11 O51 150(9) . . . . ?
O68 O62 W11 O120 13(18) . . . . ?
W17 O62 W11 O120 -9(14) . . . . ?
O68 O62 W11 O52 -91(14) . . . . ?
W17 O62 W11 O52 -113(10) . . . . ?
P6 O120 W11 O51 111(7) . . . . ?
P6 O120 W11 O62 -87(8) . . . . ?
P6 O120 W11 O52 15(7) . . . . ?
W10 O52 W11 O51 -148(4) . . . . ?
W10 O52 W11 O62 96(3) . . . . ?
W10 O52 W11 O120 -62(4) . . . . ?
W17 O61 W12 O49 -163(14) . . . . ?
O70 P7 O46 W13 -34(11) . . . . ?
W18 O60 W13 O48 -139(6) . . . . ?
W18 O60 W13 O45 12(7) . . . . ?
W18 O60 W13 O47 130(7) . . . . ?
W18 O60 W13 O46 -54(12) . . . . ?
W14 O45 W13 O48 101(8) . . . . ?
W14 O45 W13 O60 -24(8) . . . . ?
W14 O45 W13 O47 -123(8) . . . . ?
W14 O45 W13 O46 133(8) . . . . ?
P7 O46 W13 O48 21(8) . . . . ?
P7 O46 W13 O60 -70(12) . . . . ?
P7 O46 W13 O45 -142(9) . . . . ?
P7 O46 W13 O47 105(9) . . . . ?
W13 O45 W14 O43 -133(8) . . . . ?
W13 O45 W14 O44 117(7) . . . . ?
W13 O45 W14 O54A -54(7) . . . . ?
W13 O45 W14 O59 32(8) . . . . ?
W13 O45 W14 O42 -28(11) . . . . ?
W18 O59 W14 O43 46(10) . . . . ?
W18 O59 W14 O44 -124(3) . . . . ?
W18 O59 W14 O45 -25(3) . . . . ?
W18 O59 W14 O54A 63(3) . . . . ?
W18 O59 W14 O42 133(3) . . . . ?
W15 O42 W14 O43 53(3) . . . . ?
W15 O42 W14 O44 170(2) . . . . ?
W15 O42 W14 O45 -45(6) . . . . ?
W15 O42 W14 O54A -17(2) . . . . ?
W15 O42 W14 O59 -110(3) . . . . ?
W14 O42 W15 O40 -76(3) . . . . ?
W14 O42 W15 O41 -156(3) . . . . ?
W14 O42 W15 O39 46(6) . . . . ?
W14 O42 W15 O58 102(2) . . . . ?
W14 O42 W15 O54A 15.6(18) . . . . ?
W10 O39 W15 O40 -163(9) . . . . ?
W10 O39 W15 O41 -85(9) . . . . ?
W10 O39 W15 O42 71(12) . . . . ?
W10 O39 W15 O58 16(9) . . . . ?
W10 O39 W15 O54A 101(9) . . . . ?
W16 O58 W15 O40 29(28) . . . . ?
W16 O58 W15 O41 136(4) . . . . ?
W16 O58 W15 O42 -136(4) . . . . ?
W16 O58 W15 O39 22(4) . . . . ?
W16 O58 W15 O54A -57(4) . . . . ?

W15 O58 W16 O63 -131(4) . . . . ?
W15 O58 W16 O64 122(4) . . . . ?
W15 O58 W16 O57 -41(4) . . . . ?
W15 O58 W16 O56 56(4) . . . . ?
W18 O64 W16 O63 -180(3) . . . . ?
W18 O64 W16 O58 -83(3) . . . . ?
W18 O64 W16 O57 2(11) . . . . ?
W18 O64 W16 O56 5(3) . . . . ?
W10 O57 W16 O63 152(6) . . . . ?
W10 O57 W16 O58 56(6) . . . . ?
W10 O57 W16 O64 -29(14) . . . . ?
W10 O57 W16 O56 -32(6) . . . . ?
P5 O56 W16 O63 -179(100) . . . . ?
W18 O56 W16 O63 -36(18) . . . . ?
P5 O56 W16 O58 -56(4) . . . . ?
W18 O56 W16 O58 86(3) . . . . ?
P5 O56 W16 O64 -146(5) . . . . ?
W18 O56 W16 O64 -4(2) . . . . ?
P5 O56 W16 O57 33(4) . . . . ?
W18 O56 W16 O57 175(3) . . . . ?
O62 O68 W17 O67 -43(26) . . . . ?
O62 O68 W17 O66 145(19) . . . . ?
O62 O68 W17 O61 54(24) . . . . ?
W18 O66 W17 O68 -6(15) . . . . ?
W18 O66 W17 O67 -178(4) . . . . ?
W18 O66 W17 O62 15(11) . . . . ?
W18 O66 W17 O61 77(5) . . . . ?
W11 O62 W17 O68 74(25) . . . . ?
O68 O62 W17 O67 140(25) . . . . ?
W11 O62 W17 O67 -146(9) . . . . ?
O68 O62 W17 O66 -53(27) . . . . ?
W11 O62 W17 O66 21(15) . . . . ?
O68 O62 W17 O61 -122(25) . . . . ?
W11 O62 W17 O61 -48(10) . . . . ?
W12 O61 W17 O68 72(16) . . . . ?
W12 O61 W17 O67 -177(14) . . . . ?
W12 O61 W17 O66 -73(15) . . . . ?
W12 O61 W17 O62 84(15) . . . . ?
W16 O64 W18 O65 -175(3) . . . . ?
W16 O64 W18 O59 87(3) . . . . ?
W16 O64 W18 O66 -79(4) . . . . ?
W16 O64 W18 O56 -5(3) . . . . ?
W16 O64 W18 O60 -18(8) . . . . ?
W14 O59 W18 O65 117(3) . . . . ?
W14 O59 W18 O64 -131(3) . . . . ?
W14 O59 W18 O66 -88(8) . . . . ?
W14 O59 W18 O56 -63(3) . . . . ?
W14 O59 W18 O60 23(4) . . . . ?
W17 O66 W18 O65 -172(5) . . . . ?
W17 O66 W18 O64 76(5) . . . . ?
W17 O66 W18 O59 32(11) . . . . ?
W17 O66 W18 O56 6(4) . . . . ?
W17 O66 W18 O60 -81(5) . . . . ?
P5 O56 W18 O65 -118(20) . . . . ?
W16 O56 W18 O65 102(21) . . . . ?
P5 O56 W18 O64 144(5) . . . . ?
W16 O56 W18 O64 4(2) . . . . ?
P5 O56 W18 O59 60(5) . . . . ?
W16 O56 W18 O59 -80(3) . . . . ?
P5 O56 W18 O66 -129(5) . . . . ?
W16 O56 W18 O66 91(3) . . . . ?
P5 O56 W18 O60 -42(5) . . . . ?
W16 O56 W18 O60 178(3) . . . . ?
W13 O60 W18 O65 -118(7) . . . . ?
W13 O60 W18 O64 83(9) . . . . ?
W13 O60 W18 O59 -17(7) . . . . ?

```
W13 O60 W18 O66 143(7) . . . . ?
W13 O60 W18 O56 72(7) . . . . ?
O22 W2 O6A W3 -27(6) . . . . ?
O4 W2 O6A W3 -125(5) . . . . ?
O3 W2 O6A W3 68(6) . . . . ?
O5 W2 O6A W3 138(5) . . . . ?
O18 W2 O6A W3 54(5) . . . . ?
O9 W3 O6A W2 -33(12) . . . . ?
O7 W3 O6A W2 142(4) . . . . ?
O23 W3 O6A W2 29(5) . . . . ?
O8 W3 O6A W2 -130(5) . . . . ?
O19 W3 O6A W2 -56(5) . . . . ?
O17A W4 O19 W3 85(8) . . . . ?
O24 W4 O19 W3 -87(4) . . . . ?
O10 W4 O19 W3 83(3) . . . . ?
O9 W4 O19 W3 -1.7(16) . . . . ?
O9 W3 O19 W4 2(2) . . . . ?
O7 W3 O19 W4 -36(6) . . . . ?
O23 W3 O19 W4 84(2) . . . . ?
O8 W3 O19 W4 -92(2) . . . . ?
O6A W3 O19 W4 178.5(19) . . . . ?
O53A P5 O54A W14 -16(7) . . . . ?
O55A P5 O54A W14 178(4) . . . . ?
O56 P5 O54A W14 73(5) . . . . ?
O53A P5 O54A W15 -168(4) . . . . ?
O55A P5 O54A W15 26(5) . . . . ?
O56 P5 O54A W15 -79(4) . . . . ?
O43 W14 O54A P5 103(4) . . . . ?
O44 W14 O54A P5 -106(11) . . . . ?
O45 W14 O54A P5 26(4) . . . . ?
O59 W14 O54A P5 -72(4) . . . . ?
O42 W14 O54A P5 -143(5) . . . . ?
O43 W14 O54A W15 -100(2) . . . . ?
O44 W14 O54A W15 51(11) . . . . ?
O45 W14 O54A W15 -177(2) . . . . ?
O59 W14 O54A W15 85(2) . . . . ?
O42 W14 O54A W15 13.7(16) . . . . ?
O40 W15 O54A P5 -111(4) . . . . ?
O41 W15 O54A P5 178(14) . . . . ?
O42 W15 O54A P5 141(4) . . . . ?
O39 W15 O54A P5 -25(4) . . . . ?
O58 W15 O54A P5 62(4) . . . . ?
O40 W15 O54A W14 90(3) . . . . ?
O41 W15 O54A W14 19(16) . . . . ?
O42 W15 O54A W14 -17(2) . . . . ?
O39 W15 O54A W14 176(3) . . . . ?
O58 W15 O54A W14 -97(2) . . . . ?
O53A P5 O55A W10 152(7) . . . . ?
O54A P5 O55A W10 -41(9) . . . . ?
O56 P5 O55A W10 59(8) . . . . ?
O37 W10 O55A P5 9(49) . . . . ?
O39 W10 O55A P5 44(8) . . . . ?
O52 W10 O55A P5 -136(8) . . . . ?
O57 W10 O55A P5 -48(8) . . . . ?
O38 W10 O55A P5 131(8) . . . . ?
W8 O33 P1 O20 -167(3) . . . . ?
W9 O33 P1 O20 99(7) . . . . ?
W8 O33 P1 O18 -93(7) . . . . ?
W9 O33 P1 O18 172(2) . . . . ?
W8 O33 P1 W7 28(8) . . . . ?
W9 O33 P1 W7 -66(4) . . . . ?
W9 O33 P1 W8 -94(7) . . . . ?
W2 O18 P1 O33 45(7) . . . . ?
W2 O18 P1 O20 171(4) . . . . ?
W2 O18 P1 W7 -62(4) . . . . ?
W2 O18 P1 W8 12(4) . . . . ?
```

```
O27 W7 P1 O33 -51(18) . . . . ?
O26 W7 P1 O33 166(6) . . . . ?
O28 W7 P1 O33 -24(5) . . . . ?
O21 W7 P1 O33 -99(5) . . . . ?
O32 W7 P1 O33 58(5) . . . . ?
O27 W7 P1 O20 144(17) . . . . ?
O26 W7 P1 O20 1(4) . . . . ?
O28 W7 P1 O20 171(4) . . . . ?
O21 W7 P1 O20 97(4) . . . . ?
O32 W7 P1 O20 -107(4) . . . . ?
O27 W7 P1 O18 52(18) . . . . ?
O26 W7 P1 O18 -91(4) . . . . ?
O28 W7 P1 O18 79(3) . . . . ?
O21 W7 P1 O18 4(3) . . . . ?
O32 W7 P1 O18 161(4) . . . . ?
O27 W7 P1 W8 -36(17) . . . . ?
O26 W7 P1 W8 -179(3) . . . . ?
O28 W7 P1 W8 -9.0(13) . . . . ?
O21 W7 P1 W8 -83.4(15) . . . . ?
O32 W7 P1 W8 73(2) . . . . ?
O29 W8 P1 O33 -163(11) . . . . ?
O28 W8 P1 O33 161(8) . . . . ?
O30 W8 P1 O33 57(8) . . . . ?
O23 W8 P1 O33 -16(8) . . . . ?
O22 W8 P1 O33 -110(8) . . . . ?
O29 W8 P1 O20 -135(12) . . . . ?
O28 W8 P1 O20 -170(10) . . . . ?
O30 W8 P1 O20 85(10) . . . . ?
O23 W8 P1 O20 12(10) . . . . ?
O33 W8 P1 O20 28(9) . . . . ?
O22 W8 P1 O20 -82(10) . . . . ?
O29 W8 P1 O18 -74(9) . . . . ?
O28 W8 P1 O18 -109(3) . . . . ?
O30 W8 P1 O18 147(4) . . . . ?
O23 W8 P1 O18 73(3) . . . . ?
O33 W8 P1 O18 90(8) . . . . ?
O22 W8 P1 O18 -20(3) . . . . ?
O29 W8 P1 W7 45(8) . . . . ?
O28 W8 P1 W7 9.7(14) . . . . ?
O30 W8 P1 W7 -95(3) . . . . ?
O23 W8 P1 W7 -168.0(18) . . . . ?
O33 W8 P1 W7 -152(8) . . . . ?
O22 W8 P1 W7 98(2) . . . . ?
O15 P4 C3 C4 -47(8) . . . . ?
O13 P4 C3 C4 175(5) . . . . ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max    0.992
_diffrn_reflns_theta_full              23.95
_diffrn_measured_fraction_theta_full   0.992
_refine_diff_density_max    1.443
_refine_diff_density_min   -1.212
_refine_diff_density_rms    0.254
```